

Табела 5.1. Спецификација предмета на студијском програму докторских студија

Назив предмета: Теоријска спектроскопија		
Наставници: Милена Петковић, Станка Јеросимић, Михајло Етински		
Статус предмета: Изборни		
Број ЕСПБ: 10		
Услов: Нема услова		
Циљ предмета Упознавање студената са модерним теоријским методама у спектроскопији. Обучавање за рад са програмским пакетима за рачунање структуре и спектра молекула.		
Исход предмета Студент ће бити упознат са водећом литературом из теоријске спектроскопије и оспособљен да користи модерне теоријске методе и одговарајуће програмске пакете за рачунање, интерпретацију и предвиђање структуре молекула, њихових спектра и реактивности.		
Садржај предмета <i>Теоријска настава</i> Увод: квантна хемија и спектроскопија; теорија група и спектроскопија; адијабатска апроксимација. Електронска структура: теорија молекулских орбитала, теорија валентне везе. Модерне теоријске методе: једнореферентне и вишереферентне методе рачунања електронских стања; теорија функционала густине. Квантна динамика и спектроскопија: временски зависна Шредингерова једначина; динамика таласног пакета; спектри и корелационе функције. Квантна динамика и спектроскопија: примена; једно- и двоелектронска спектроскопија; молекулске вибрације; утицај анхармоничности на динамику и спектре молекула. <i>Практична настава</i> Коришћење софтверских пакета. Теоријске вежбе: таласни пакет; апсорпциони електронски спектар – једнодимензиони хармонијски модел; рачунање вибрационих фреквенција у хармонијској апроксимацији; вертикални електронски спектар линеарних троатомских молекула; анализа природних везивних орбитала молекула.		
Препоручена литература 1. Спектри и структуре молекула, М. Перић, САНУ, Београд, 2009. 2. Molecular Quantum Mechanics, P.W. Atkins, Oxford Univerity Press, 1997. 3. Modern Quantum Chemistry, A. Szabo, N.S. Ostlund, Macmillan Publishing Co., New York, 1996. 4. Introduction to Computational Chemistry, F. Jensen, John Wiley & Sons, 1999. 5. Density-Functional Theory of Atoms and Molecules, R.G. Parr, W. Yang, Oxford University Press, 1989. 6. Computational Molecular Spectroscopy, P. Jensen and P.R. Bunker (Eds.), John Wiley & Sons Ltd. 2000.		
Број часова активне наставе	Теоријска настава: 5	Практична настава: 2
Методe извођења наставе Предавања, дискусије, консултације, семинари, рад на рачунару.		
Оцена знања (максимални број поена 100): Практична настава: 10 поена; Семинар: 40 поена; Усмени испит: 50 поена		